Prof. Dr. Andreas Knorr
Mathias Hayn, Marc Hennes, Helge Neitsch, Jan F. Totz, Kilian Kuhla, Anke Zimmermann

9. Übungsblatt – Quantenmechanik I

Abgabe: Fr. 21. 6. 2013 bis 11:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in 3er-Gruppen erfolgen. Bitte geben Sie Ihre Namen, Matrikelnummern und das Tutorium an.

Aufgabe 16 (10 Punkte): *Spin-1/2-Teilchen & Pauli-Matrizen*

Elementarteilchen besitzen neben einer Masse und einer Ladung u.a. noch eine weitere fundamentale Eigenschaft: den Spin. In der Quantenmechanik wird der Spin durch Spin-Operatoren $\hat{S}_i$ beschrieben. Für Spin-1/2-Teilchen können die $\hat{S}_i$ durch Pauli-Matrizen σ_i dargestellt werden:

$$\hat{S}_i \doteq \frac{\hbar}{2}\sigma_i. \tag{1}$$

Eine mögliche Darstellung der hermiteschen und unitären Pauli-Matrizen lautet:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ und } \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

(a) Zeigen Sie unter Verwendung dieser Darstellung, dass die Spin-Operatoren in der Tat Drehimpulsoperatoren sind. Zur Erinnerung: Drehimpulsoperatoren erfüllen die Kommutatorrelationen $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk}\, \hat{S}_k$.

(b) Rechnen Sie außerdem nach, dass die Pauli-Matrizen die Antikommutatorrelation $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{i,j}\mathbb{1}_2$ erfüllen. Hier ist $\{A, B\} = A\,B + B\,A$ der Antikommutator und $\mathbb{1}_2$ ist die 2×2-Einheitsmatrix.

(c) Benutzen Sie die Darstellung (1), um zu zeigen, dass die Operatoren $\hat{S}_i$ tatsächlich Spin-1/2-Teilchen beschreiben. Zur Erinnerung: Der *Betrag* des Drehimpulses eines Teilchens hängt mit dem Operator $\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ zusammen.

Der Hilbert-Raum von Spin-1/2-Teilchen ist zweidimensional und soll durch die beiden Zustände φ_+ und φ_- beschrieben werden. Mit der obigen Darstellung der Pauli-Matrizen werden diese Zustände durch die folgenden Spaltenvektoren dargestellt:

$$\varphi_+ \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und } \varphi_- \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

(d) Berechnen Sie den Erwartungswert von $\hat{S}_z$ in diesen beiden Zuständen und interpretieren Sie Ihr Ergebnis.

(e) Was bewirken $\hat{S}_\pm := \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$, $\hat{S}_+\hat{S}_-$ und $\hat{S}_-\hat{S}_+$ angewendet auf die Zustände $\varphi_\pm$?

Aufgabe 17 (10 Punkte): *Addition von Drehimpulsen*

In dieser Aufgabe betrachten wir das Positronium. Dabei handelt es sich um ein gebundenen Zustand eines Positrons und eines Elektrons. Als Anti-Teilchen des Elektrons ist das Positron auch ein Spin-1/2-Teilchen. Der Spin des Positroniums setzt sich aus den Spins von Elektron und Positron zusammen und kann die Werte 0 (Parapositronium) und 1 (Orthopositronium) annehmen. Der Hilbert-Raum des Positroniums, $\mathcal{H}$, ensteht aus dem Tensorprodukt der Hilbert-Räume von Elektron, $\mathcal{H}^{(e)}$, und Positron, $\mathcal{H}^{(p)}$, d.h. $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(e)} \otimes \mathcal{H}^{(p)}$. Der Spin des Positroniums, $\hat{S}_i$, setzt sich durch *Addition* der zwei Spins von Elektron, $\hat{S}_i^{(e)}$, und Positron, $\hat{S}_i^{(p)}$, zusammen: $\hat{S}_i = \hat{S}_i^{(e)} \otimes \mathbb{1}^{(p)} + \mathbb{1}^{(e)} \otimes \hat{S}_i^{(p)} \equiv \hat{S}_i^{(e)} + \hat{S}_i^{(p)}$. Dabei ist $\mathbb{1}^{(e/p)}$ die Identität im Hilbert-Raum des Elektrons/Positrons. Stellt man die Spin-Operatoren $\hat{S}_i$ wie in Aufgabe 16 durch Matrizen dar, so ist das Produkt $\otimes$ (beispielsweise in $\hat{S}_i^{(e)} \otimes \mathbb{1}^{(p)}$) ein Kronecker-Produkt. So gilt z.B.

$$\hat{S}_x^{(e)} \otimes \mathbb{1}^{(p)} \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{(e)} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^{(p)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

(a) Berechnen Sie $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$, deren Quadrate und schließlich $\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$.

(b) Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von $\hat{\mathbf{S}}^2$. Ist $\hat{S}_z$ in der Eigenbasis von $\hat{\mathbf{S}}^2$ diagonal? Wenn ja, geben Sie den Eigenwert zu jedem Eigenvektor von $\hat{\mathbf{S}}^2$ an.

(c) Wir definieren die Zustände $\varphi_{++} = \varphi_+^{(e)} \otimes \varphi_+^{(p)}$, usw., mit $\varphi_\pm$ wie in Aufgabe 16. Diese sind Eigenvektoren von $\hat{S}_z^{(e)}$ und $\hat{S}_z^{(p)}$. Mit der Darstellung aus Aufgabe 16 haben diese die Form:

$$\varphi_{++} \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}^{(e)} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}^{(p)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Stellen Sie die Eigenvektoren von $\hat{\mathbf{S}}^2$ durch die Zustände φ_{++}, φ_{+-}, φ_{-+} und φ_{--} dar. Welche der Eigenvektoren gehören zu Ortho-, welche zu Parapositronium?

Bonusaufgabe 18 (10 Zusatzpunkte): *Störungstheorie*

Betrachten Sie den harmonischen Oszillator $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$ wie aus der Vorlesung. Nun nehmen wir an, dass die Frequenz des Oszillators durch Wechselwirkung mit der Umgebung leicht verschoben ist. Dies wird durch den Stör-Hamilton-Operator

$$\hat{H}_1 = \varepsilon \, \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \tag{6}$$

beschrieben. Dabei sei die Störung schwach, d.h. $\varepsilon \ll 1$.
Der Gesamt-Hamilton-Operator lautet dann $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$. Ziel dieser Aufgabe ist es, unter Verwendung der stationären Störungstheorie, näherungsweise die Energien des gestörten Oszillators zu berechnen.

(a) Berechnen Sie die Energie des n-ten Energieniveau in nullter Ordnung Störungstheorie, $E_n^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \varphi_n^*(x) \, \hat{H}_0 \, \varphi_n(x)$. Dabei sind φ_n die Eigenzustände von $\hat{H}_0$.

(b) Wie lautet die Korrektur zur Energie des n-ten Energieniveau in erster Ordnung Störungstheorie, $E_n^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \varphi_n^*(x) \, \hat{H}_1 \, \varphi_n(x)$?

(c) Die Eigenwerte des Hamilton-Operators $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ lassen sich auch exakt ausrechnen. Tun Sie das und vergleichen Sie diese exakte Lösung mit den Ergebnissen der Störungstheorie.